

## IV. 量子物性研究部門

### 1. メンバー

教授 矢花 一浩  
 准教授 小野 倫也、小泉 裕康、全 晓民  
 講師 前島 展也  
 研究員 植本 光治、山田 篤志、山田 俊介、竹内 嵩、野田 真史、  
           Arqum Hashmi、廣川 祐太 (2018.10～)  
 学生 大学院生 11名、学類生 4名  
 教授 日野 健一 (学内共同研究員、物質工学域)  
       岡田 晋 (学内共同研究員、物理学域)

### 2. 概要

本部門は、計算物質科学のいくつかの分野にわたる研究を行っているが、特に光と物質の相互作用に関する研究に特色を有している。時間依存密度汎関数理論に基づく固体中の電子ダイナミクスや光応答の計算、時間依存シュレディンガー方程式に基づく原子や分子と光の相互作用、強相関電子系の光応答など、多様な物質を対象とした光物質科学分野の計算科学研究を行っている。また、界面の伝導特性に対して、第一原理計算に基づく解析を進めており、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の原子構造解析などを行った。強相関電子系では、銅酸化物高温超伝導の超伝導機構の解明を、スピントルーブル電流を電流要素とする超伝導理論に基づいて行っている。またスピントルーブル電流を量子ビットとした量子コンピューターに関する理論的研究を行っている。

これらの計算科学研究に加えて、独自の計算コード開発も行なっている。時間依存密度汎関数理論に基づき光と物質の相互作用を記述する汎用の第一原理光科学ソフトウェアとして、SALMON を開発し、ウェブサイト <https://salmon-tddft.jp> において公開している。また実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算コード RSPACE の開発を行っている。

### 3. 研究成果

#### 【1】 光科学分野の第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発 (矢花、植本、竹内、野田、廣川、山田(篤)、山田(俊)、廣川、朴[高性能計算システム研究部門] )

パルス光と多様な物質の相互作用を物質科学の第一原理計算に基づき記述する汎用のソフトウェア SALMON の構築を進めている。これは先端の光科学実験を丸ごとシミュレーションすることができ、原子の空間スケールとアト秒の時間解像度で現象を分析することができ

る、他に例のない特徴を持つソフトウェアである。SALMON は、筑波大学で開発を進めていた ARTED と分子科学研究所で開発を進めていた GCEED を統合したオープンソースソフトウェアとして構築され、現在ウェブページ <https://salmon-tddft.jp> を整備し公開している。また以下で述べるように、單原子層から薄膜・表面まで記述する理論と計算法の開発、光・電子・フォノンの 3 者のダイナミクスを同時に記述する第一原理計算法の開発など、光科学の多様な現象に対応する取り組みを続けている。

また、理化学研究所計算科学研究センター（理研 R-CCS）で開発中のポスト京（スーパーコンピュータ富岳）への SALMON 実装を開始している。SALMON/ARTED は Knights Landing (KNL) クラスタ “Oakforest-PACS” に対し強力に最適化を行ってきたが、我々は同実装を活用することでポスト京への実装と大規模シミュレーションを円滑に遂行できると考えている。現在までに、主に SALMON/ARTED で利用されているステンシル計算について、KNL 向けの AVX-512 SIMD 命令実装をポスト京の A64FX プロセッサが採用する Scalable Vector Extension (SVE) SIMD 命令に変換、動作を確認した。本件は、理研 R-CCS が提供するポスト京シミュレータ上で性能評価を実施中である。

SALMON に関して、下で述べるハンズオンチュートリアルの実施など、その普及に務めている。大阪大学が毎年、年 2 回実施しているコンピュテーションナル・マテリアルズ・デザインワークショップにおいて、2018 年度から SALMON の実習を継続的に取り上げて頂いており、SALMON のチュートリアルを実施している。高度情報科学技術研究機構 (RIST) が行なっている HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 事業において、日本で開発されたオープンソースソフトウェアのうち利用の多いものを、各大学の情報基盤センターの所有するスパコンにプリインストールする利用者支援活動が行われている。SALMON は、物質科学分野の計 3 本のソフトウェアの一つとして、その支援対象に選ばれた。現在 SALMON は、東工大、名古屋大、九州大のスパコンにインストールされている ([http://www.hpci-office.jp/pages/appli\\_software](http://www.hpci-office.jp/pages/appli_software))。

## 【2】マクスウェル方程式と時間依存密度汎関数を多階層で結合したシミュレーション法の発展（矢花、植本）

### (1) 斜法入射のマルチスケール法における取扱について

我々はこれまで、第一原理電子ダイナミクス計算と電磁界計算をハイブリッドさせた、独自のマルチスケール計算手法の開発を進めてきた。先行研究では薄膜系（一次元マクスウェル方程式）への垂直入射に制限した議論が行われてきた。一方で、「反射・屈折現象」、「境界面の表面電荷」、「表面プラズモン励起」、「（実験などでよく用いられる）Brewster 角入射」を議論する上で、任意角度入射条件（斜方入射）を取り扱えることは重要である。

今年度、我々は一次元マルチスケール計算法を斜方伝搬する電磁場を取り扱うためのフォーマリズム構築・計算コードへの実装作業をおこなった。

また、本プロジェクトに関連してマックスプランク研究所（実験）と筑波大学（計算）の共同研究を進めており、これまで SALMON コードをもちいたアト秒分光実験の計算機シミュレーションを試みてきた。（実験では）ブリュースター角度入射されたフェムト秒レーザーパルスが固体中を伝搬する過程の非線形光学効果によるパルス波形変化を観測している。本手法を実装した理論計算は実験の振る舞いをよく再現する結果を得ることに成功している。

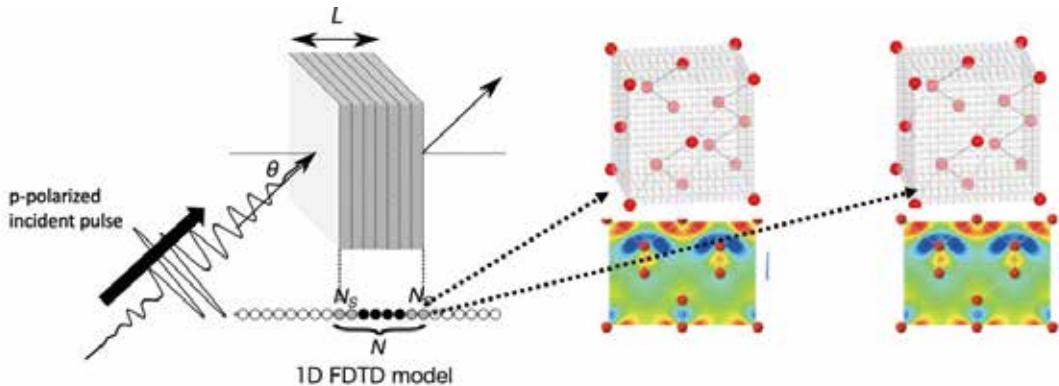


図1：Maxwell+TDDFT マルチスケール法による、斜め方向に伝搬するレーザーパルスの光透過シミュレーションの概略図

## (2) グラファイト薄膜と強レーザーパルスの相互作用の第一原理シミュレーション

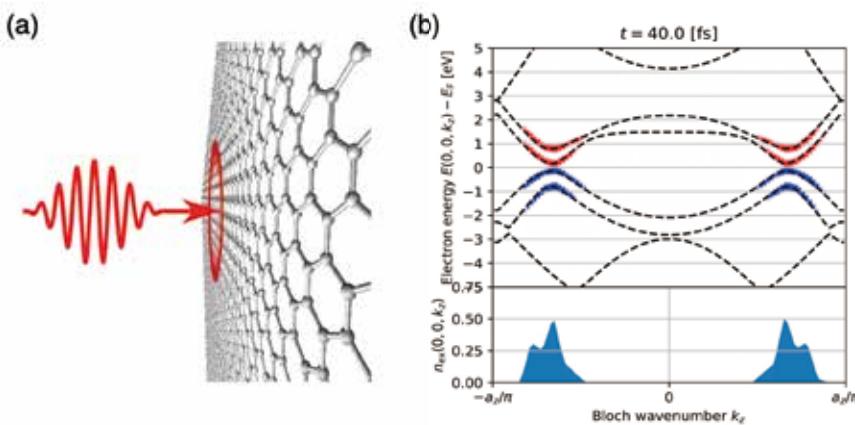


図2：(a)計算モデル概略、(b)可飽和吸収条件下における励起電子(赤)、ホール(青)の  $k$  空間分布

グラフェン・グラファイトなどの層状物質では、二次元的電子状態密度の存在により、巨大かつ高速な可飽和吸収（光強度依存の吸収率変化）などの特徴的な非線形光学特性の存在が知られている。本研究では、TDDFT をもちいた、グラファイト、1～4層グラフェン、層状リン、TiS<sub>2</sub> 等の二次元物質の光学応答の第一原理計算から、10 フェムト秒オーダーの短時間で現れる可飽和吸収の出現を確認した。また、後述のマルチスケール計算による、グラ

ファイト結晶内のレーザーパルス伝搬、侵入深さにあらわれる光強度依存性の評価を行った。本理論予測は、炭素材料に対するレーザー加工のシミュレーションへの応用が期待される。(これらの成果をまとめた論文が現在投稿準備段階にある。)

**【3】 原子層を含む薄膜とパルス光の相互作用を記述する単一空間格子を用いたマクスウェル方程式と時間依存密度汎関数法の統合シミュレーション (山田(俊)、野田、矢花)**

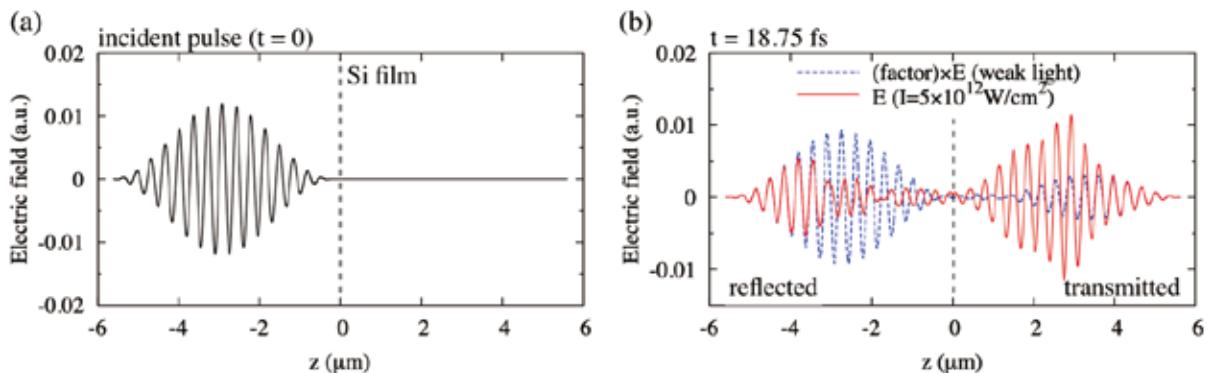


図3：厚さ 5nm の Si 薄膜に高強度光パルスを照射する微視的 Maxwell-TDDFT 計算。(a) 画面上で右向きに進む入射パルス (パルス幅 18 fs, 光振動数  $\hbar\omega=3.5$  eV, 強度  $I=5\times 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup>)。(b) 反射波と透過波。青線は線形応答領域の結果をファクター倍したもの。パルスの後半で非線形相互作用によるパルス形状の変化が確認できる。

薄膜における高次高調波発生や非熱的なレーザ加工のシミュレーションは、理学・産業両面から興味ある研究テーマである。しかしながら、2次元物質を含む極めて薄い薄膜における光・電子相互作用を考える場合、相互作用領域が極端に狭いため、上記のような電子系と光電磁場の空間スケールを分離するマルチスケール的な記述は適当でない。そこで本研究では、单一の空間スケールで電子系と電磁場を結合する新手法を開発した。本手法は、光電磁場のための微視的 Maxwell 方程式と電子系のための時間依存 Kohn-Sham 方程式を結合し、共通の実空間グリッド上で同時に時間発展させる第一原理計算法である。光の強度や薄膜の厚さに依らず光・電子相互作用を記述できるため、本手法はこの問題における包括的な枠組みとなる。また、薄膜が薄い極限と厚い極限の場合について議論し、それぞれの場合に有効な巨視的近似法を構築した。特に、厚い極限の巨視的近似法はマルチスケール Maxwell+TDDFT 法に一致する。具体的には、例えば Si 薄膜では膜厚およそ 5nm で両近似法の結果がほぼ一致し、それよりも薄い場合は薄膜化による電子構造変化を取り入れた近似法を、厚い場合は光減衰の効果を取り入れた近似法（マルチスケール法）を採用すれば良いことがわかった。こ

れにより、薄膜の光・電子相互作用を網羅的に記述することが可能になった。以後は本研究の手法を活用して薄膜の非調和光・電子相互作用に関する応用研究を進める予定である。

#### 【4】 光電磁場・電子・格子振動を同時に記述する多階層シミュレーション法の開発と、コヒーレントフォノンのポンプ・プローブ分光への応用（山田(篤)、矢花）

マルチスケール法に MD 機能を加えたシミュレーション、すなわち、光電磁波の伝搬と第一原理分子動力学をマルチスケールモデルの枠組みで連立させた Maxwell + TDDFT + MD 法を開発して SALMON に実装した。この計算手法を用いると、光電磁波の照射に始まり、物質との相互作用とともに光の伝搬、干渉、反射、透過といった複雑な分光プロセス全体を実験系そのままに模倣した時間発展を追跡でき、分光シグナルを直接的に再現することができる。

本手法の最初の適用として、コヒーレントフォノンの生成に関わる瞬間誘導ラマン分光によるポンプ・プローブ測定のシミュレーションを行った。右図に示すように、マクロスケール（一次元モデル）において時間幅 18 fs/1.55 eV (800 nm) のポンプ光および遅延時間 89.5 fs のプローブ光を真空領域から物質領域へ入射する。ここで物質領域は 15 nm のマクログリッド 400 個からなる膜厚 6 μm のダイヤモンド結晶である。これらマクログリッド各々に対して 8 原子から成る一辺 3.567 Å のユニットセル（三次元）をミクロスケールの系（空間グリッド数  $16^3$ , k 点数  $12^3$ , LDA 汎関数）として配置し、両スケールとも時間刻み幅 0.002 fs で積分した。

バンドギャップエネルギー以下のポンプ光との非共鳴型相互作用により原子核の振動（光学フォノン）が誘起されている様子が得られ、さらにポンプ光の伝搬に伴つ

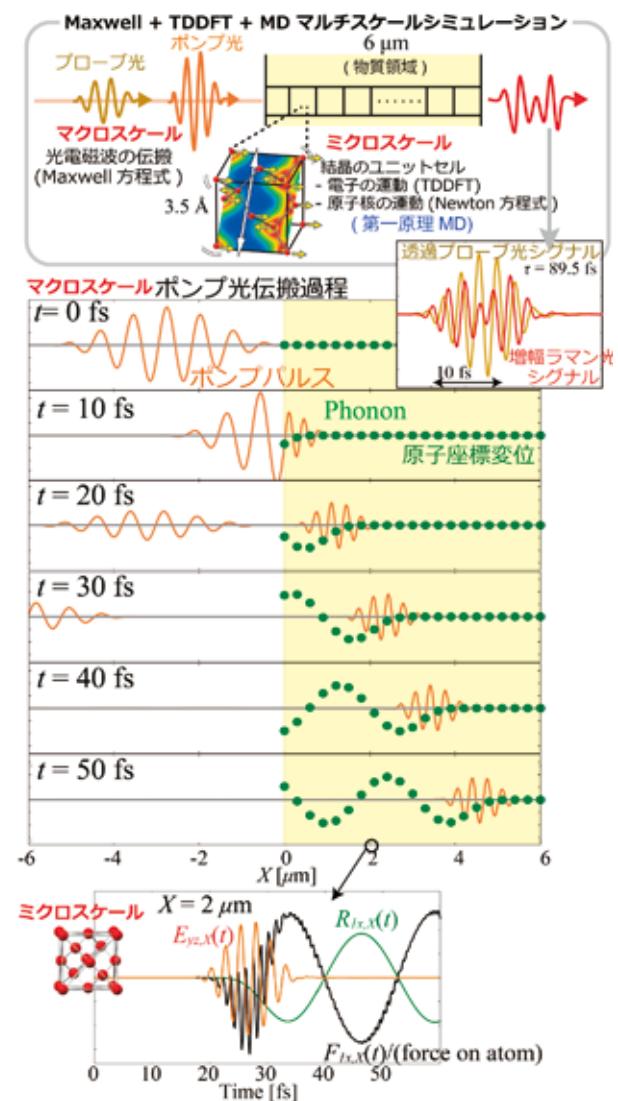


図 4 : Maxwell + TDDFT + MD マルチスケール法の概略図、および瞬間誘導ラマン分光におけるポンプ光照射過程でのコヒーレントフォノン生成のマクロ・ミクロ両スケールでの時間発展。

て位相が異なるフォノンが各点で次々と生じている、つまりコヒーレントフォノンの生成が再現された（図4）。続くプローブ光プロセスでは、コヒーレントフォノンとの相互作用により誘導ラマン波が増幅し、透過プローブシグナルが再現された。これら一連の描像は実験プロセスの詳細を明らかにするとともに、より正確な透過シグナルの理解を与えることができた。

### 【5】 金属ナノ粒子が2次元配列したメタ表面の光応答（竹内、野田、矢花）

近年金属ナノ粒子を2次元配列したメタ表面が注目されている。特に、金属ナノ粒子間の距離（ギャップ）をサブ nmまで縮小させギャップでの高い光増強を利用することで、自然界では見られない高い屈折率を持つメタ表面が得られることが実験で報告され、多くの関心を集めている。本研究ではTDDFTを用い、サブ nmのギャップを持つメタ表面の光物性解析を行った。また、古典電磁気学計算機能を SALMON に実装し、比較を行った。結果、古典電磁気学ではギャップが小さい程光増強が高まるのに対し、TDDFTではギャップ 0.4nm付近を境に金属界面間にトンネル電流が流れ、光増強が失われることを示した（図5）。これにより、メタ表面の高屈折率化設計のための重要な指針が明らかとなった。

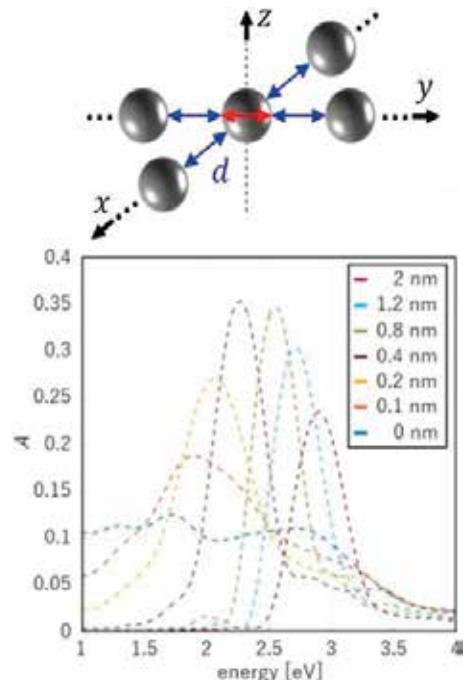


図5：メタ表面の光吸収率

### 【6】 金ナノ粒子・グラフェン系の光応答（野田、飯田（分子科学研究所））

光照射時に金ナノ粒子から発生した励起電子によるグラフェンの電気伝導の増強が観測されていることから、金ナノ粒子とグラフェンからなる複合系は光電子デバイスへの応用が期待されている系である。金ナノ粒子から発生する光近接場が電気伝導に影響を及ぼすこと考えられるが、この系における原子レベルでの光励起の理解についてはこれまで行われていない。そこで系全体の光学応答の第一原理計算を SALMON で行った。

図は、グラフェンの層に水平な  $y$  偏光の光を照射した時の金-グラフェン系のパワースペクトルである。 $y$  方向には入射光と同じエネルギー (2.3 eV) の線形な応答のみが生じている。一方、グラフェンの層に垂直な  $z$  方向には、入射エネルギーの二倍 (4.6 eV) の応答のピークが見てとれる(図 6)。これは、近接場光の空間的な非一様性に由来すると考えられ、エチレンを内包した有機金属錯体に対して同様の二倍波発生が報告されている。加えて、0 eV 近傍にもピークが存在する(図中 II)。これは、金とグラフェンの間の光誘起電子移動という、量子力学的な相互作用で支配される光学応答現象であることが明らかになった。光近接場の空間的な非一様に着目したさらなる解析は、近接場光を用いる光電子デバイスの高機能化に繋がると期待される。

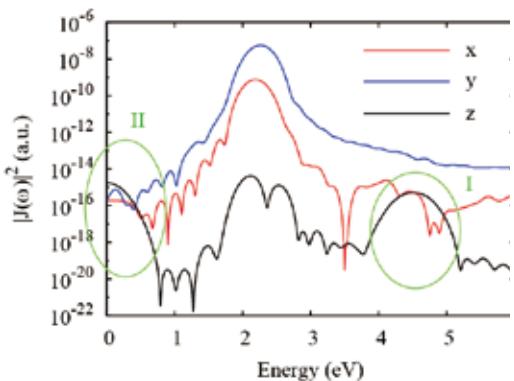


図 6：金-グラフェン系に  $y$  偏光の光を照射した時のカレントのパワースペクトル。

## 【7】 第一原理計算コード RSPACE の改良（小野）

第一原理計算コード RSPACE の伝導計算のボトルネックであった電極自己エネルギー計算部分を改良した。櫻井-杉浦法のように部分的に固有解を求める方法を用いて電極自己エネルギーを計算する場合、自己エネルギーの要素に急峻なエバネッセント波まで取り込む必要がある。しかし、周回積分時に使用する疎行列を係数行列とする連立方程式ソルバの計算コストは、ブロック係数の絶対値の対数に対し、2乗に比例して増大することが問題であった。今年度は、周回積分の積分領域を複素平面上でリング状に分割する方法を開発した。この方法により、緩やかなエバネッセント波に対しては、少ない計算コストで計算できるため、従来法に対して最大で 6 倍の高速化が可能になった。この方法を用いて、カーボンナノチューブの複素バンド構造を計算し、改良法の計算効率と精度の高さを実証した。

### 【8】 窒化アニール後の SiC/SiO<sub>2</sub> 界面原子構造の探索（小野）

SiC は、次世代パワーエレクトロニクスデバイス用のチャネル材料として期待されているものの、MOSFET のキャリア移動度が SiC バルクよりも大幅に低いことが本格普及への課題となっている。NO アニールによって移動度が向上することが分かっているが、アニールによって導入された N の役割や界面に N が入った原子構造は現在まで明らかになっていない。共同研究を行う産総研の共同研究グループが行った実験によると、界面の 0.5nm 程度の領域に N が局在していることが分かっているが、N が界面の基板側にいるのか SiO<sub>2</sub> 側にいるのか分かっていない。今年度は、基板側に N が局在すると仮定して、界面の原子構造を調べた。その結果、図 7 のように界面第一層に N 原子が挿入した構造に界面欠陥準位は生成されないこと、N 原子は基板内部よりも界面第一層に存在する方が安定であることが分かった。

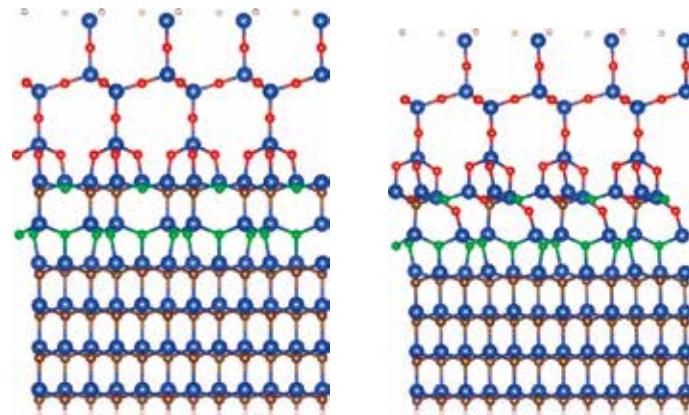


図 7 : NO アニール後の SiC/SiO<sub>2</sub> 界面原子構造。(左) 窒化界面。(右) 酸化界面。青球、赤球、緑球、茶球

は、Si、O、N、C 原子。

表 1 : (酸)窓化界面の形成エネルギー(eV/(3x1)unit)。

	窓化界面		酸窓化界面	
	h 面	k 面	h 面	k 面
結晶モデル	+0.64	+1.02	+1.13	+1.65
界面モデル	0.00	+0.38	0.00	+0.40

入した構造に界面欠陥準位は生成されないこと、N 原子は基板内部よりも界面第一層に存在する方が安定であることが分かった。また、この場合の N 原子面密度は実験結果と矛盾しない。さらに、NO アニールをしない SiC/SiO<sub>2</sub> 界面では、h 面と k 面の 2 種類の界面の形成エネルギー差が数 meV/unit しかなく、両方が出現することにより伝導帯端が揺らぎキャリア散乱が起こる。一方、表 1 に示すように、(酸)窓化界面は h 面の形成エネルギーが 0.4 eV/unit 程度低く、h 面界面が優先的に形成されるため、NO アニールにより移動度低下の原因になりうる伝導帯端の揺らぎを抑えられることが分かった。

**【9】 銅酸化物超伝導体におけるラシュバ相互作用と自発的外部電流供給状態（小泉、真鍋）**

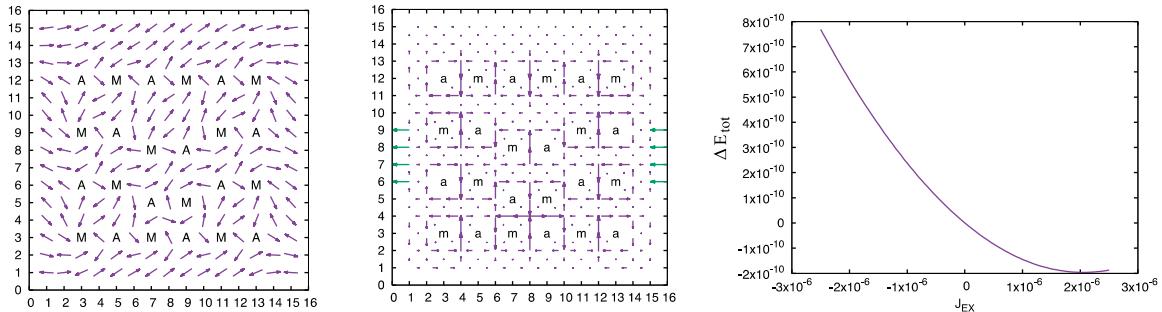


図8：銅酸化物  $\text{CuO}_2$  面に存在する 24 のスピン渦（左）、スピン渦誘起ループ電流（中央）、エネルギーの外部電流依存性（右）。M(A)は巻き数 1(-1)のスピン渦、m(a)は巻き数 1(-1)のループ電流を表す。外部電流  $J_{\text{EX}}$  は中央の図で、緑色の矢印で表されている。右図が示すように、外部電流  $J_{\text{EX}}$  がゼロでない値のところでエネルギーが最小値を取っている。

これは、この値の外部電流が自発的に流れることを意味する。

ラシュバ型相互作用が存在する場合、外部からの電流の供給を可能とする境界条件を持つ系では、自発的に電流が供給される状態が生じることを突き止めた。図8に計算例を示す。左図のように 24 個のスピン渦が存在する系に、中央図の緑色で示した矢印のように外部電流を供給した場合を考える。この時、中央図に示すように、スピン渦に対応し 24 個のスピン渦誘起ループ電流が生じる。計算では、面に垂直な電場成分を持つラシュバ相互作用が、渦中心の直近に存在するとしている。この時、右図が示すように、外部電流がゼロでない状態の方が、外部電流がゼロである状態よりもエネルギーが低くなっている。これは、自発的に外部からの電流供給が起こることを意味し、この電流は実験で観測されている超伝導電流を説明する。これまで、このような状態を理論的に計算した例はなく、超伝導研究における一つの画期となる理論的な結果であると考えられる。

【10】スピン渦誘起ループ電流を量子ビットとした量子コンピューター：surface code を実現するアーキテクチャーに関する研究（小泉、真鍋）

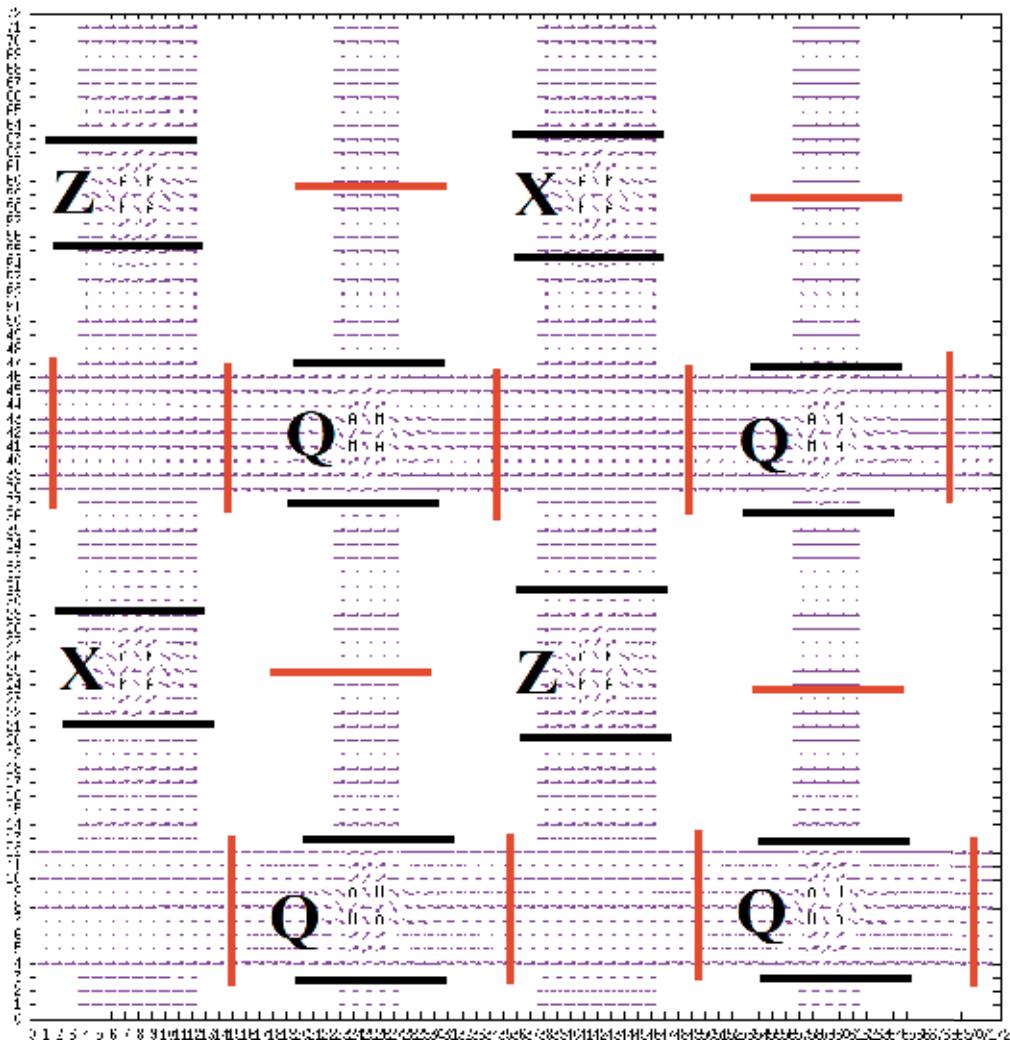


図9：surface code を実現するスピン渦誘起ループ電流を量子ビットとする量子コンピューターのアーキテクチャーの例（8量子ビット系）。各々の量子ビットは、4つ組のスピン渦誘起ループ電流よりなる。Qはデータビットを表し、XとZがエラーのシンドローム測定に利用する量子ビットである。量子ビット間の結合は、外部電流を（赤、黒のラインに沿って）供給することにより行う。

スピン渦誘起ループ電流はトポロジカルに保護されており、その電流の方向を2準位として量子ビットを作ることができる。実際には、いくつかのループ電流をひとまとまりとして一つの量子ビットとした方が、都合がよく、我々は、4つ組のループ電流で1量子ビットを作る場合を研究している。量子ビット間の結合は外部電流の供給によりOn-Offが可能であり、それを利用すれば、ナノサイズでsurface code を実現するアーキテクチャーが可能になる。

我々は、8量子ビット系で図9のようなアーキテクチャーを考察している。計算量がかなり大きくなり、シミュレーションを行うのに時間がかかりすぎ、現在までのところ具体的な結果を出せていない。今後、モデルを簡素化し、計算を効率化する必要がある。

### 【11】赤外線強レーザー場における酸素分子電離過程の制御（トン）

我々が開発したFFTにより新しい時間依存密度汎関数計算方法をスーパーコンピューター(Oakforest-PACS [OFP])に移植し、その計算方法で赤外線強レーザー場における酸素分子電離過程を調べた。特に電離確率と軟X線と赤外線強レーザー場偏光向きとの依存性や二つのパルスの時間遅延との関係を解明した。我々の計算でアメリカローレンス・バークレー国立研究所での実験結果を解釈した。本研究は国際共同研究の成果として、Physical Review Aに発表した。

### 【12】重水素分子解離過程における電子相関の寄与（トン）

新しい計算方法で、短パルス軟X線レーザーにより、重水素分子電離に伴う解離過程について調べた。図のように、単電子近似の計算と多電子の計算結果とアメリカの実験グループの観測結果と比べて、高い励起状態における電子相関の寄与を明らかになった。特に時間遅延の手法で、電子相間と原子イオン間距離の関係を初めて明らかになった。本研究は多国国際共同研究の成果として、Physical Review Aに発表した。

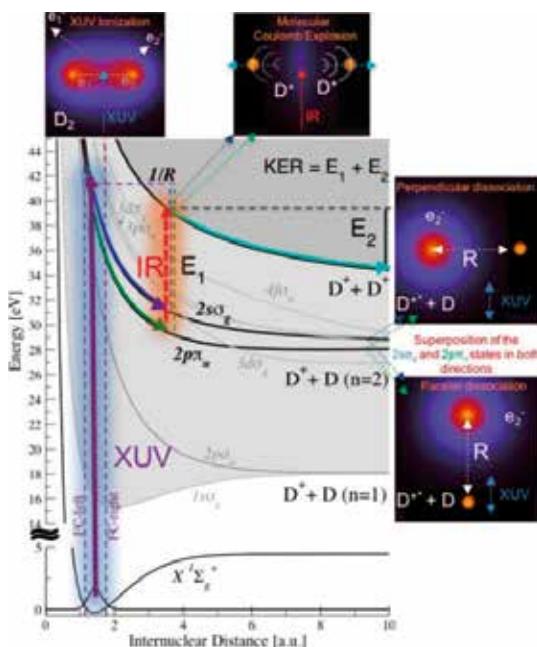


図10：重水素分子軟X線吸収に伴う解離過程

### 【13】 強相関電子系における励起状態・レーザー誘起状態の研究（前島）

低次元強相関電子系の理論模型の一種であるイオン性ハバード模型の動的電荷構造因子を厳密対角化などにより数値的に調べ、本来は電荷励起状態を観測する量である動的電荷構造因子にスピン励起状態起源のスペクトルピークが現れることを見出し、厳密解等の解析計算との比較から特に 2-spinon singlet と呼ばれる励起状態が強いスペクトル強度を有することを明らかにした（図 11）。またスピンフラストレーション系であるジグザグハバード梯子模型にレーザー光を照射した場合生じるフロケ状態の解析から実効的飛び移り積分による光誘起相転移が起こりうることを厳密対角化計算により示した。

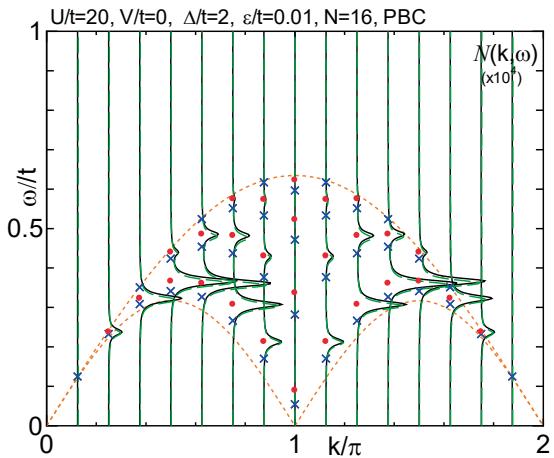


図 11：イオン性ハバード模型における電荷動的構造因子  $N(k,\omega)$ 。

## 4. 教育

### 博士論文

岩瀬 滋 Development and application of first-principles real-space transport calculations

### 修士論文

出口 泰資 レーザー場中のハバード梯子模型におけるフロケ状態の解析

林田 伸明 半導体コヒーレントフォノン生成におけるプラズモン効果

堀川 健 長さゲージを用いた周期系の電子ダイナミクス計算

### 卒業論文

岩瀬 悠馬 1 次元イオン性ハバード模型の動的電荷構造因子に対する低エネルギー有効模型による解析

酒井 貴義 トポロジカル絶縁体における不純物効果

奥田 悠希 コヒーレントフォノン生成における過渡的プラズモン・フォノン相互作用

森口 大志 Su-Schrieffer-Heeger 模型におけるフロケ状態の解析

## 5. 受賞、外部資金、知的財産権等

### 受賞

なし

## 外部資金

1. JST CREST 「光・電子融合第一原理計算ソフトウェアの開発と応用」、矢花一浩、代表、2016-2021 年度、37200 千円（2018 年度直接経費）
2. ポスト京重点課題 7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」サブ課題 B 「光・電子融合デバイス」、矢花一浩、分担、2016-2019 年度、15208 千円（2018 年度直接経費）
3. Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点 「次世代アト秒レーザー光源と先端計測技術の開発」、矢花一浩、3170 千円（2018 年度直接経費）
4. 日本学術振興会、科研費基盤研究（B）「第一原理計算に基づく極限パルス光と物質の相互作用の解明」、矢花一浩、代表、2015-2018 年度、2300 千円（2018 年度直接経費）
5. 共同研究経費、株式会社 IHI、「時間依存第一原理解析によるフェムト秒レーザと物質との相互作用に関する研究」、矢花一浩、450 千円（2018 年度直接経費）
6. 日本学術振興会、科研費基盤研究(B) 「大規模第一原理スピニ輸送シミュレータの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」、小野倫也、代表、2018 年、3,300 千円
7. 筑波大学、筑波大学・DAAD パートナーシップ・プログラム、小野倫也、代表、2018 年、150 千円、「大規模物質・デバイス設計シミュレーションを目指した第一原理計算コードの開発」
8. 民間企業、学術指導、小野倫也、100 千円。
9. 日本学術振興会、研究拠点形成事業、小野倫也、分担、2016 年、400 千円、「半導体集積デバイス向け二次元電子・スピニ材料研究拠点」
10. 日本学術振興会、科研費基盤研究(C) 「2 色円偏光レーザー場における原子・分子電離過程の解明と制御」、全 晓民、代表、2018 年、650 千円、

## 知的財産権

なし

## 6. 研究業績

### (1) 研究論文

#### A) 査読付き論文

1. M. Noda, S.A. Sato, Y. Hirokawa, M. Uemoto, T. Takeuchi, S. Yamada, A. Yamada, Y. Shinohara, M. Yamaguchi, K. Iida, I. Floss, T. Otobe, Kyung-Min Lee, K. Ishimura, T. Boku, George F. Bertsch, K. Nobusada, K. Yabana, "SALMON: Scalable Ab-initio Light–Matter

- simulator for Optics and Nanoscience", Computer Physics Communications. Volume 235, 356 (2019).
2. T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, K. Yabana, "Theory for Electron Excitation in Dielectrics under an Intense Linear and Circularly Polarized Laser Fields", J. Phys. Soc. Jpn. 88, 024706 (2019).
  3. A. Yamada, K. Yabana, "Energy transfer from intense laser pulse to dielectrics in time-dependent density functional theory", Eur. Phys. J. D, (2019) 73: 87.
  4. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato, and K. Yabana, "Nonlinear polarization evolution using time-dependent density functional theory", J. Chem. Phys. 150, 094101 (2019).
  5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "Time-dependent density functional theory for interaction of ultrashort light pulse with thin materials", Phys. Rev. B 98, 245147 (2018)
  6. A. Yamada, K. Yabana, "Multiscale time-dependent density functional theory for a unified description of ultrafast dynamics: Pulsed light, electron, and lattice motions in crystalline solids", Phys. Rev. B, accepted.
  7. I. Floss, C. Lemell, K. Yabana, J. Burgdorfer, "Incorporating decoherence into solid-state time-dependent density functional theory", Phys. Rev. B, accepted.
  8. T. Yatsui, S. Okada, T. Takemori, T. Sato, K. Saichi, T. Ogameoto, S. Chiashi, S. Maruyama, M. Noda, K. Yabana, K. Iida, K. Nobusada, "Enhanced photo-sensitivity in a Si photodetector using a near-field assisted excitation", Comm. Phys., accepted.
  9. T. Takeuchi, T. Sako, K. Nobusada, "Light-dressed states under intense optical near fields", Phys. Rev. A 98, 053440 (2018).
  10. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui, K. Nobusada, "Direct Wave Vector Excitation in an Indirect Band Gap Semiconductor of Silicon with an Optical Near-Field", Phys. Rev. Applied 11, 044053 (2019).
  11. K. Iida, M. Noda, K. Nobusada, "Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C.122, 37, 21651-21658, DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b05684 (2018).
  12. K. Iida, M. Noda, K. Nobusada, "Photoinduced Electron Transfer at the Interface between Heterogeneous Two-Dimensional Layered Materials", JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 122, 37, 21651-21658 (2018).
  13. K. Takagi, T. Ono, "First-principles study on leakage current caused by oxygen vacancies at HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>/Si interface", Jpn. J. Appl. Phys. 57(6) 066501 1-4 (2018).

14. S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, S. Tsukamoto, T. Ono, "Contour integral method for obtaining the self-energy matrices of electrodes in electron transport calculations", Phys. Rev. B **97**(19) 195449 1-15 (2018).
15. S. Tsukamoto, T. Ono, S. Iwase, S. Blügel, "Complex band structure calculations based on the overbridging boundary matching method without using Green's functions", Phys. Rev. B **98**(19) 195422 1-19 (2018).
16. T. Harashima, Y. Hasegawa, S. Kaneko, M. Kiguchi, T. Ono, T. Nishino, "Highly Reproducible Formation of a Polymer Single-Molecule Junction for a Well-Defined Current Signal", Angew. Chem. in press.
17. T. Ono, "DFT calculation for oxidation reaction of SiC(0001)", Mater. Sci. Forum, accepted.
18. P. Ranitovic, F. P. Sturm, X. M. Tong, T. W. Wright, D. Ray, I. Zalyubovskya, N. Shivaram, A. Belkacem, D. Slaughter, Th. Weber, "Attosecond coherent control of oxygen dissociation by XUV-IR laser fields using three-dimensional momentum imaging", Phys. Rev. A **98**, 013410:1:11 (2018).
19. S. Borbely, X.-M. Tong, S. Nagele, J. Feist, I. Brezinov, F. Lackner, L. Nagy,<sup>1</sup> K. Tokesi, and J. Burgdorfer, "Electron correlations in the antiproton energy-loss distribution in He", Phys. Rev. A **98**, 012707:1:12 (2018).
20. L. Martin, R. Y. Bello, C. W. Hogle, A. Palacios, X. M. Tong, J. L. Sanz-Vicario, T. Jahnke, M. Schöffler, R. Dörner, Th. Weber, F. Martín, H. C. Kapteyn, M. M. Murnane, and P. Ranitovic, "Revealing the role of electron-electron correlations by mapping dissociation of highly excited D<sub>2</sub><sup>+</sup> using ultrashort XUV pulses", Phys. Rev. A **97**, 062508 (2018).
21. X. M. Tong, "Photoelectron angular distribution of atoms in pulsed XUV and IR fields", Phys. Rev. A, accepted.
22. D. Manabe and H. Koizumi, "Magnetic field induced charge order in cuprate superconductors: and explanation by spin-vortex-induced loop currents", J. Phys.: Conf. Ser. **1148**, 012009 (2018).
23. D. Manabe and H. Koizumi, "Supercurrent generation by spin-twisting itinerant motion of electrons", J. Supercond. Nov. Magn. **32**, 2303-2312, (2019).
24. Y. Komaki, Y. Iwase, S. Yanagimatsu, Y. Muta, N. Maeshima, and K. Hino, "Dynamical charge structure factor of a one-dimensional ionic Hubbard model in the low-energy region", J. Phys. Soc. Jpn. (2019) accepted.
25. Y. Watanabe, K. Hino, N. Maeshima, H. Petek, M. Hase, "Ultrafast asymmetric Rosen-Zener-like coherent phonon responses observed in silicon", Phys. Rev. B **99**, 174304 (2019).

**B) 査読無し論文**

1. A. Yamada, K. Yabana, "First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04020 (2019).
2. M. Uemoto, K. Yabana, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 04023 (2019).
3. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", Proceedings of XXI International Conference on Ultrafast Phenomena 2018, **205**, 01003 (2019).
4. B. Buades, A. Picón, I. León, N.D. Palo, S.L. Cousin, C. Cocchi, E. Pellegrin, J. H. Martin, S. Mañas-Valero, E. Coronado, T. Danz, C. Draxl, M. Uemoto, K. Yabana, M. Schultze, S. Wall, J. Biegert, "Attosecond-resolved petahertz carrier motion in semi-metallic TiS<sub>2</sub>", arXiv: 1808.06493.
5. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて"、第 29 回光物性研究会論文集、205-208 (2018).
6. X. Gao and X. M. Tong, "Photoabsorption of atoms in a strong elliptical laser field", submit to ICPEAC2019.
7. X. M. Tong and N. Toshima, "Abnormal photoelectron angular distribution of Aratoms in pulsed XUV and IR laser fields", submit to ICPEAC2019.
8. H. Koizumi, "Theory of Supercurrent generation in BCS Superconductors", arXiv:1810.125.
9. S. Borbely, X. M. Tong, et al., "Energy loss of p and pbar in He: electron correlation effects", submit to ICPEAC2019.

**(2) 国際会議発表**

**A) 招待講演**

1. K. Yabana, "Ab-initio simulations for ultrashort laser-pulse irradiation on nanomaterials ", SPIE Defense + Commercial Sensing 2018, Orlando, Florida, USA, April 15, 2018
2. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "Ab-initio large-scale simulation for initial stage of laser damage in transparent nano-materials", 3rd Smart Laser Processing Conference 2018, Pacifico Yokohama, April 24-26, 2018

3. K. Yabana, "Practical Aspects of TDDFT Calculations", TDDFT School and SALMON Hands-on Seminar, Univ. Tsukuba, Nov. 11-12, 2018
4. K. Yabana, "First-Principles Simulations for Extreme Light-Matter Interaction ", 50th Reimei Workshop on Universal Physics in Many-Body Quantum Systems - From atoms to Quarks, Ibaraki Quantum Beam Research Center, Tokai, Dec. 12-14, 2018
5. K. Yabana, "First-principles calculation for propagation of strong laser pulse with dielectrics International Symposium on Ultrafast Electronic and Structural Dynamics", Tohoku University, Sendai, March7-8, 2019
6. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT Ab initio Multiscale Simulation and Application to Nano-optics", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
7. A. Yamada, K. Yabana, "Maxwell + Nonadiabatic ab initio MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
8. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, "Microscopic and Macroscopic descriptions for interaction of ultrashort light pulse with thin materials", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations 2018 (AIEDS18), Tsukuba, Japan, Nov. 16, 2018
9. M. Uemoto, "Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in Nano-Optics", International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019, RIKEN R-CCS, Jan. 16, 2019
10. T. Ono, "Evolution of ab-initio calculation based on real-space finite-difference method for massively parallel computers", International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2019, Kobe, Japan, January 15-17, 2019

## B) 一般講演

1. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "A first-principles simulation method for ultrafast nano-optics", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany. July 15-20, 2018 (Poster)
2. M. Uemoto and K. Yabana, "Ab-initio simulation for propagation of ultrashort laser pulse in solids" SPIE Photonics Europe, Strasbourg, France, Apr.24, 2018 (Oral)
3. M. Uemoto, S. A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, K. Yabana, "Ab-initio large-scale computational approach for ultrafast dynamics in nano-structures", EXCON2018, Nara, Japan, Jul. 9, 2018 (Oral)

4. Atsushi Yamada, Kazuhiro Yabana, "First Principle Electrons Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Photon Energy Dependent Energy Transfer", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Germany Hamburg, July 2018 (Poster)
5. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "First-principles method for propagation of ultrashort pulsed light in thin films", XXI International Conference on Ultrafast Phenomena, Hamburg, Germany, July 19, 2018 (Poster)
6. K. Yabana, M. Uemoto, S.A. Sato, Y. Hirokawa, T. Boku, "Ab-initio multiscale simulation method for ultrafast nano-optics,15th Int. Conf. on Near-Field Optics", The 15<sup>th</sup> International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
7. M. Noda, M. Yamaguchi, K. Iida and K. Nobusada , " First principles calculations for wave vector excitations of silicon induced by optical near fields", The 15<sup>th</sup> International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
8. T. Takeuchi and K. Nobusada, "Electronic States Dressed up in an Optical Near Field: Optical Responses Induced by Spatial Symmetry and Asymmetry", The 15<sup>th</sup> International Conference of Near Field Optics Nanophotonics and Related Techniques, Troyes, France, Aug. 26-31, 2018 (Poster)
9. A. Yamada, K. Yabana, " First-Principles Electron Dynamics Simulation Study of High Intensity Laser Irradiation on Crystal Systems: Pulse Frequency Dependent Energy Transfer", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
10. M. Uemoto, Y. Kuwabara, S. A. Sato and K. Yabana, "Spatio-Temporal Analysis of Nonlinear Optical Responses by Time-Dependent Density Functional Theory", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
11. T. Takeuchi and K. Yabana, "Optical Properties of Metallic Nanoparticle Arrays by TDDFT", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov. 14, 2018 (Poster)
12. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, T. Yatsui and K. Nobusada, "Direct wave vector excitations of silicon induced by optical near fields", International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations, Tsukuba, Japan, Nov.14, 2018 (Poster)

13. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, K. Yabana, "Comprehensive theoretical framework for light-matter interaction in thin materials based on TDDFT ", CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Japan, Jan. 16, 2019 (Poster)
14. T. Takeuchi and K. Yabana, "Optical Responses of a Metasurface Consisting of Metallic Nanoparticles", CSW2019, Ryogoku, Tokyo, Jan. 16, 2019 (Poster)
15. M. Uemoto, K. Yabana, "Large-scale ab-initio simulation for nano-optics based on time-dependent density functional theory", The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster)
16. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada and K. Yabana , "Massively-parallel first-principles calculations for near field optics: wave vector excitations in silicon", The 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, Feb. 18, 2019 (Poster)
17. Atsushi Yamada and Kazuhiro Yabana, "Maxwell + First-Principles TDDFT-MD Multi-Scale Simulation and Application to Impulsive Stimulated Raman Scattering Spectroscopy", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March, 2019 (Oral)
18. M. Uemoto and K. Yabana, "Maxwell+TDDFT multiscale simulation for optical response of nanomaterials", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
19. S. Yamada, M. Noda, K. Nobusada, and K. Yabana, "Microscopic and macroscopic Maxwell-TDDFT descriptions for light-matter interaction in thin materials", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
20. M. Noda, K. Iida, M. Yamaguchi, K. Ishimura, T. Yatsui, K. Nobusada, K. Yabana, "Massively-parallel time-dependent density functional theory calculations for optical near-field excitations in silicon", APS March Meeting 2019, Boston, USA, March 5, 2019 (Oral)
21. T. Ono, "Density functional study on functionality of nanoscale devices", JSPS Core to Core workshop, Cambridge, UK, April 16-18, 2018
22. T. Ono, "Evolution of ab-initio transport calculation scheme based on real-space method", Workshop on UT/DAAD partnership program "Development of first-principles calculation codes for large scale simulations targeting materials and device design", Tsukuba, Japan, April 26, 2018
23. T. Ono, S. Tsukamoto, "Improvement of wave-function-matching technique for large-scale first-principles electron-transport calculation", H30 年度 ポスト「京」重点課題（7） 第 3 回 CDMSI 研究会, Tokyo, Japan, July 19-20, 2018
24. T. Ono, "DFT calculation for electronic structure of SiC/SiO<sub>2</sub> after nitridization", European Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2018, Birmingham, UK, September 2-6, 2018

25. T. Ono, "DFT Study on Atomic and Electronic Structures of SiC/SiO<sub>2</sub> after NO Annealing", 49th IEEE Semiconductor Interface Specialists Conference, San Diego, USA, December 6-8, 2018
26. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene and h-BN based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions", 19th International Workshop on Computational Physics and Material Science: Total Energy and Force Methods 2019, Italy, January 9-11, 2019
27. X. M. Tong, "Theoretical Studies on Antiproton Captured by H and He atoms", Workshop to discuss PUMA experiment and its future possibilities, Osaka University, Aug. 24, 2018
28. H. Koizumi, "Charge order in cuprate superconductors: effect of Rashba spin-orbit interaction", XXIVth International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Santander, Spain, June 24-29, 2019
29. H. Koizumi, "Reformulating supercurrent generation in superconductors", 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors, Beijing, China, August 19-24, 2018
30. H. Koizumi, "Superconducting state as an energy minimal state under external current feeding: A story of gauge potential from Maxwell to Berry", 筑波大学—エジンバラ大学 合同ワークショップ, Edinburgh, UK, December 3-4, 2018
31. H. Koizumi, "Error correctable architecture for quantum computers using spin-vortex-induced loop current qubits", LBNL/CRD-Tsukuba/CCS Meeting, Berkeley, USA, March 6–7, 2019
32. DB Esry et al., "Comparing the performance of time-dependent-Schrödinger-equation solvers for the 800-nm, one-electron-atom, strong-field problem", 49<sup>th</sup> Annual Meeting of the APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Lauderdale, FL, USA, May 28-June 1, 2018

### C) セミナー等

1. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses"、ウィーン工科大学（オーストリア）、2019年3月20日
2. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses"、グラーツ大学（オーストリア）、2019年3月25日
3. 矢花一浩、"Ab-initio description for propagation of extreme light pulse in solids: Recent progresses"、マックスプランク物質構造力学研究所（ドイツ）、2019年3月27日
4. 小泉裕康、"External current as a coupler between spin vortex induced loop current qubits"、Federal University of Rondonia、Porto Velho（ブラジル）、2019年3月27日

**(3) 国内学会・研究会発表**

**A) 招待講演**

1. 矢花一浩、"第一原理計算光・物質科学の創成"、光極限第 5 回領域会議、柏の葉カンファレンスセンター、2018 年 4 月 21 日
2. 矢花一浩、"電子ダイナミクスの第一原理計算を巡って"、光とナノ物質の相互作用：分子科学の未来に向けて、岡崎コンファレンスセンター、2018 年 6 月 10 日
3. 矢花一浩、"高強度超短パルス光と誘電体の相互作用を記述する第一原理計算"、BRL セミナー、NTT 物性科学基礎研究所、2018 年 8 月 20 日
4. 矢花一浩、"誘電体の超高速光応答～第一原理計算からのアプローチ～"、レーザー学会学術講演会シンポジウム「固体におけるアト秒・強光子場科学の最前線、東海大学高輪キャンパス、2019 年 1 月 13-14 日
5. 矢花一浩、"固体超高速現象に対する数値実験手法の開発と応用"、日本光学会光波シンセシス研究グループ研究会「光の絶対位相制御と分光計測・物質操作への応用」、東京大学生産技術研究所、2019 年 2 月 12 日
6. 矢花一浩、物質科学分野における高強度パルス光を用いた研究の現状と展望～理論・計算物理からの視点～ 日本物理学会第 74 回年次大会シンポジウム「チャーブパルス增幅法の恩恵」九州大学、2019 年 3 月 14-17 日

**B) その他の発表**

1. 矢花一浩、"汎用光科学第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発と応用"、H30 年度ポスト「京」重点課題（7）第 3 回 CDMSI 研究会、東京大学、2018 年 7 月 19-20 日（口頭）
2. 植本光治、矢花一浩、"第一原理電子ダイナミクス計算による ナノフォトニクスシミュレーション"、3 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題（7））シンポジウム、東京大学、2018 年 7 月 19 日（口頭）
3. 野田真史、飯田健二、信定克幸、"表面-金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクス"、第 3 回 CDMSI（ポスト「京」重点課題（7））シンポジウム、東京大学、2018 年 7 月 19-20 日（口頭）
4. 植本光治、矢花一浩、"第一原理電子ダイナミクス計算による半導体微細構造の斜方向光伝搬シミュレーション"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、2018 年 9 月 10 日（口頭）
5. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜・表面における光伝搬の実時間第一原理シミュレーション"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学、京田辺、2018 年 9 月 10 日（口頭）

6. 山田篤志、矢花一浩、"瞬間誘導ラマン分光の Maxwell/TDDFT/MD マルチスケールシミュレーション—ダイヤモンドにおけるコヒーレントフォノンのポンプープローブ分光シグナルの解析—"、第 79 回応用物理学会秋季学術講演会、名古屋、2018 年 9 月 21 日(口頭)
7. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンとシグナルの計算への適用"、分子シミュレーション討論会、産業総合研究所、2018 年 11 月 29 日(口頭)
8. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算のための 斜め方向光入射の取り扱いについて"、第 29 回光物性研究会、II-51、京都大学宇治おうばくプラザ、2018 年 12 月 8 日(口頭)
9. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell + TDDFT + MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるコヒーレントフォノンへの適用"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、2018 年 12 月 12 日(ポスター)
10. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜における光・物質相互作用のための微視的および巨視的理論"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原 2018 年 12 月 12 日(ポスター)
11. 竹内嵩、矢花一浩、"第一原理計算による微小金属周期列の光物性解析"、CREST 次世代フォトニクス領域会議、秋葉原、2018 年 12 月 12 日(ポスター)
12. 植本光治、桑原有輝、佐藤俊介、矢花一浩、"TDDFT による非線形光学応答の時空間空間解析"、ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、柏、2018 年 12 月 17 日(ポスター)
13. 野田真史、飯田健二、信定克幸、"表面-金クラスター複合系における光誘起電子ダイナミクス"、ポスト「京」重点課題(7)「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、柏、2018 年 12 月 17 日(ポスター)
14. 植本光治、"第一原理電子ダイナミクス計算に基づくナノフォトニクスシミュレーション"、MI2I マテリアルズ探索グループ拡大合同 Working 「ナノテクノロジーにおけるマテリアルズ・インフォマティクス・ネットワーク」、浜松、2019 年 2 月 17 日(口頭)
15. 山田篤志、矢花一浩、"コヒーレントフォノンとプローブ光シグナルの位相差の理論解析およびシミュレーションによる検証"、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学、2019 年 3 月 9 日(口頭)

16. 竹内嵩、矢花一浩、"時間依存密度汎関数法による微小金属周期配列の光物性解析"、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、東京工業大学、2019 年 3 月 10 日（口頭）
17. 山田篤志、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT+MD マルチスケールシミュレーションの開発および瞬間誘導ラマン分光におけるポンプープローブ分光への適用"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日（口頭）
18. 植本光治、矢花一浩、"Maxwell+TDDFT マルチスケール計算によるナノフォトニクスシミュレーション"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日（口頭）
19. 山田俊介、野田真史、信定克幸、矢花一浩、"薄膜とパルス光の相互作用に対する包括的第一原理計算方法の構築"、日本物理学会第 74 回年次大会(2019 年春季大会)、九州大学、2019 年 3 月 15 日（口頭）
20. 廣川祐太、"電子動力学アプリケーション SALMON の各最先端プロセッサへの実装状況"、ポスト「京」重点課題（7）「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成(CDMSI)」第 4 回シンポジウム、千葉、2018 年 12 月 17 日（口頭）
21. 廣川祐太、朴泰祐、矢花一浩、"AVX-512 Intrinsics で実装されたステンシル計算の Scalable Vector Extension への展開"、第 168 回 HPC 研究会、Vol. 2019-HPC-168 No. 4、石川、2019 年 3 月 5 日（口頭）
22. 小野倫也、"第一原理計算による SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の電子状態解析と評価"、内閣府 SIP 成果報告会、大阪、2018 年 7 月 20 日
23. 中西健太、小野倫也、A. Hashmi、"二次元 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> のスピinn伝導特性計算"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
24. 岩瀬滋、小野倫也、"空間分割と特異値分解による自己エネルギー計算方法の開発"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
25. A. Hashmi, K. Nakanishi, T. Ono, "Graphene and h-BN based symmetric and non-symmetric magnetoresistive junctions"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡 2019 年 3 月 14 日～17 日
26. 真鍋大地、"スピinn渦誘起ループ電流理論:モンテカルロ法による銅酸化物超伝導体超伝導転移温度の計算"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日
27. 小泉裕康、"スピinn渦誘起ループ電流理論:電流の保存を利用した、波動関数の一価性条件を満たす波動関数の計算方法"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日
28. 真鍋大地、小泉裕康、"銅酸化物超伝導体の量子臨界性と超伝導 T<sub>c</sub>"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日

29. 小泉裕康、"ベリー接続を含んだ密度汎関数法と超伝導"、日本物理学会第 74 回年次大会、福岡、2019 年 3 月 14 日～17 日
30. 出口泰資、前島展也、日野健一、"ジグザグハバード梯子模型のレーザー誘起現象"、日本物理学会 2018 年秋季大会、同志社大学京田辺キャンパス、2018 年 9 月 9-12 日

#### (4) 著書、解説記事等

1. 矢花一浩，“レーザー加工初期過程を記述する第一原理光科学計算法”，レーザー加工学会誌 Vol.25 No.2 2018 pp.3-7
2. 乙部智仁、矢花一浩、佐藤駿丞、篠原康，“高強度短パルスレーザー照射下にある絶縁材料の第一原理計算”，J. Plasma Fusion Research Vol.94, No.5 2018 pp.266-269

### 7. 異分野間連携・国際連携・国際活動等

1. 光科学ソフトウェア SALMON の開発にあたり、高性能計算システム研究部門の朴グループと密接な研究協力を行なっている。
2. アト秒光科学に関し、マックスプランク量子光学研究所（ドイツ・ガルヒング）及びバルセロナ大学（スペイン）の実験グループと共同研究を行っている（矢花）。
3. 時間依存密度汎関数理論を用いた光と物質の相互作用に関して、内殻電子ダイナミクス計算についての共同研究をマックスプランク物質構造動力学研究所（ドイツ・ハンブルク）の理論グループと、位相緩和に関する共同研究をウィーン工科大学（オーストリア）の理論グループと行っている（矢花）。
4. H2020-MSCA-RISE（欧州の国際交流プロジェクト）による光と物質の相互作用の理論と計算に関わる国際ネットワーク形成プロジェクト ATLANTIC の申請に矢花が加わった。このプロジェクトは採択され、2019.4 より開始予定である。

### 8. シンポジウム、研究会、スクール等の開催実績

1. International School and Tutorial on Time-Dependent Density Functional Theory and SALMON Hands-on Tutorial

SALMON の利用者を拡大する活動として、2017 年度に、SALMON を用いたハンズオン（スパコンを用いた実習）を含む第一回 SALMON チュートリアルを実施したが、2018 年度も継続して行なっている。2018 年度は 11 月に、以下のような国際スクール・チュートリアルを実施した。2 日間の日程で行い、午前中のスクールでは、SALMON の背景となる理論について、国際的に著名な研究者による講義を実施し、午後は本 CREST で雇用の研究員が中心となり筑波大学のスパコンで SALMON を利用する実習を行なった。図 1 に、午前中の講義の様子を示す。主に博士後期課程の大学院生やポスドクなどの若手研究者を中心に、海

外からの参加者 23 名を含む 57 名が参加した。このイベントは、SALMON の利用者拡大と国際的な認知において、大変有意義であった。



図 1：国際スクール・チュートリアルの教室。

- ・日程：2018 年 11 月 12 日(月)～ 13 日 (火)
- ・場所：筑波大学計算科学研究センター 会議室 A
- ・参加人数：日本人 26 名、国内外外国人 8 名、海外参加者 23 名 合計 57 名

## 2. International Symposium on Ab Initio Electron Dynamics Simulations (AIEDS2018)

国際スクール・チュートリアルに引き続く 3 日間の日程で、SALMON が主な対象とする電子ダイナミクス計算を主題とする国際シンポジウムを実施した。シンポジウムでは招待講演を含めて 30 件の口頭発表と 14 件のポスター発表があり、海外からの参加者 38 名を含め 75 名が参加した。口頭発表 30 件のうち SALMON を利用した発表が 6 件あり、SALMON がこの分野で有用であることをアピールする大変良い機会となった。



図 2：国際シンポジウムの会場

- ・日程：2018 年 11 月 14 日(水)～16 日(金)
- ・場所：つくば国際会議場(EPOCAL) 102 室
- ・参加人数：日本人 31 名、国内外外国人 6 名、海外参加者 38 名 合計 75 名

- ・（参考）スクール及びシンポジウムの重複を除いた参加人数：日本人 38 名、国内外外国人 10 名、海外参加者 39 名 合計 87 名

3. JST-CREST 研究課題進捗報告・討論会、神奈川県足柄下郡、2018 年 9 月 27 日（矢花）。

## 9. 管理・運営

矢花：

(センター内) 計算科学研究センター運営委員会委員、人事委員会委員、運営協議会委員、先端計算科学推進室長、共同研究委員会委員、量子物性研究部門長  
(学内) 物理学域運営委員、筑波大学 50 年史編纂専門委員会委員、物理学類カリキュラム委員

小泉：応用理工学類、入試実施委員（長）、筑波大学全学計算機システム、3D サテライト管理

前島：計算科学研究センター共同利用委員会の一般利用委員会において、当センター大規模一般利用プログラムの申請受付などの業務を担当した。

## 10. 社会貢献・国際貢献

矢花：

- ・2018 年 9 月及び 2019 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップにおいて SALMON のチュートリアルを実施。
- ・平成 30 年度テニュアトラック普及・定着事業委員会委員。

小野：

- ・2019 年 2 月に大阪大学にて開催された CMD ワークショップのスパコンコースで、本グループで開発している第一原理計算コード RSPACE のチュートリアルを行った。
- ・ポスト「京」プロジェクト重点課題 7 「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」の産学官連携担当として活動した。

## 11. その他

1. SALMON に関する広報。プレスリリース（筑波大、分子研、東工大各 HP）、先端の光科学に役立つ第一原理計算ソフトウェア SALMON の開発、2019 年 2 月 1 日。科学新聞、先端光科学研究に貢献 第一原理計算ソフト、2019 年 2 月 22 日。

2. SALMON に関する一般記事。実験をリアルに再現するマルチスケール シミュレーション～「光と物質の相互作用」を理解する、京算百景 Vol.22, 2018.7
3. マンスリーサバティカルによる海外滞在（小泉）、Federal University of Rondonia, Porto Velho, Brazil、平成 31 年 3 月 18 日～平成 31 年 4 月